

Краткая инструкция по работе с базой данных Reaxys

1	Начало работы
2	Домашняя страница
3	Персональные настройки
4	Генерация структуры из названия
5	Запрос по реакциям – закладка Reactions
6	Запрос по реакциям – дополнительные условия поиска
7	Результаты поиска по реакциям – общий вид
8	Результаты поиска по реакциям – закладка Reactions
9	Результаты поиска по реакциям – фильтрация
10	Планирование синтеза
11	Вывод результатов
12	История
13	Запрос по веществам и свойствам – закладка Substances and Properties
14	Запрос по веществам и свойствам – дополнительные условия поиска
15	Вещества и свойства – просмотр результатов
16	Результаты поиска по веществам и свойствам – вывод в виде таблицы
17	Результаты поиска по веществам и свойствам – вывод в виде сетки
18	Поиск библиографической информации – закладка Text, authors and more
19	Результаты поиска библиографической информации – закладка Citations

Начало работы

Для запуска **Reaxys**: www.reaxys.com

Дополнительная информация по работе с **Reaxys**: www.info.reaxys.com, в том числе:

- Охват, применение и технические требования
- Регистрационная форма для получения **Reaxys Newsletter**
- Пользовательская поддержка:
 - Расписание Web-семинаров – регулярные обучающие сеансы – и регистрационная форма для них
 - Часто задаваемые вопросы (FAQ)
 - Программное обеспечение (плагины и структурные редакторы) и документация (учебные материалы)
 - Контактная информация:

Европа, Ближний Восток, Азия и Африка

+49-69-5050 4268

nlinfo@reaxys.com

Америка

+1 888 615 4500

usinfo@reaxys.com

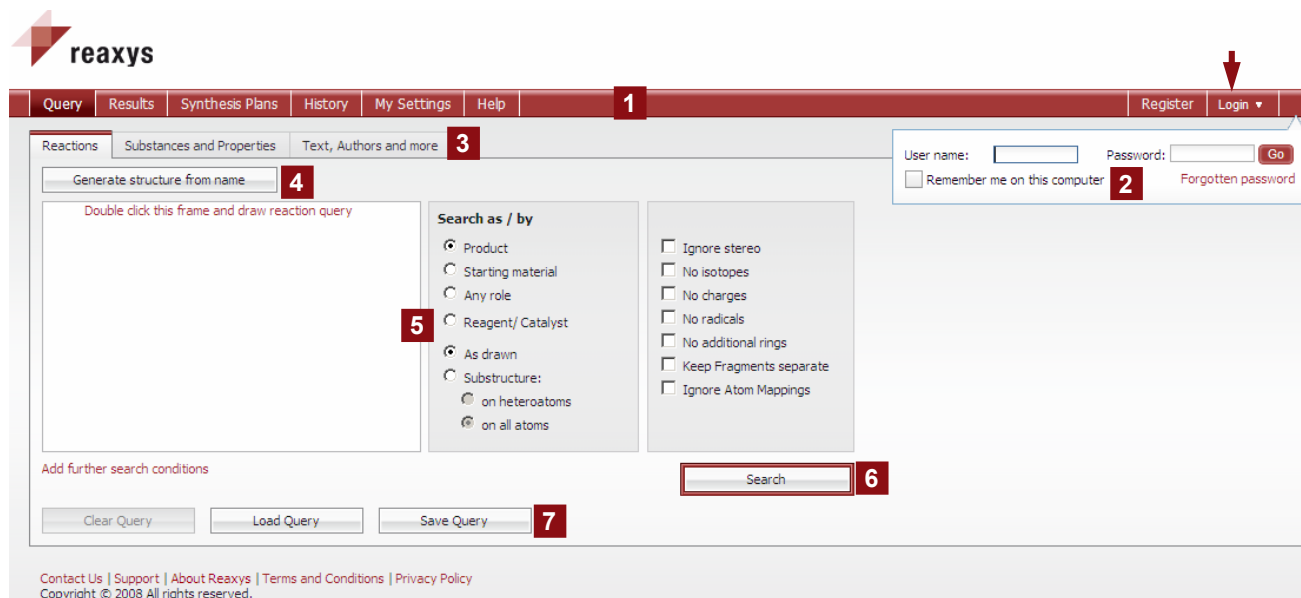
+1 212 462 1978 при звонке извне США и Канады

Япония

+81 3 5561 5034

jpinfo@reaxys.com

Домашняя страница



The screenshot shows the Reaxys home page interface. Red boxes with numbers 1 through 7 highlight specific features: 1. The top navigation bar containing links like Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings, Help, Register, and Login. 2. The login form with fields for User name, Password, and a Remember me checkbox. 3. The main navigation tabs: Reactions, Substances and Properties, and Text, Authors and more. 4. The 'Generate structure from name' input field. 5. The 'Search as / by' section with radio buttons for Product, Starting material, Any role, Reagent/ Catalyst, As drawn, and Substructure. 6. The Search button. 7. The bottom command buttons: Clear Query, Load Query, and Save Query.

1 Основная навигационная панель:

Содержит следующие опции

- Query: Запрос
- Results: Результаты поиска
- Synthesis Plans: Планы синтеза
- History: История
- My Settings: Персональные настройки
- Help: Помощь
- Register: Регистрация
- Login: Вход в систему

2 Вход в систему

Ввод имени пользователя и пароля

3 Закладки для запросов

- по реакциям
- по веществам и свойствам
- по тексту, авторам и другим полям

4 Генерация структуры из названия

Трансформация химического названия в структуру

5 Окно Структура / Реакция

Окно ввода структуры или реакции с дополнительными поисковыми возможностями

6 Клавиша поиска Search

Запуск поиска

7 Командные клавиши

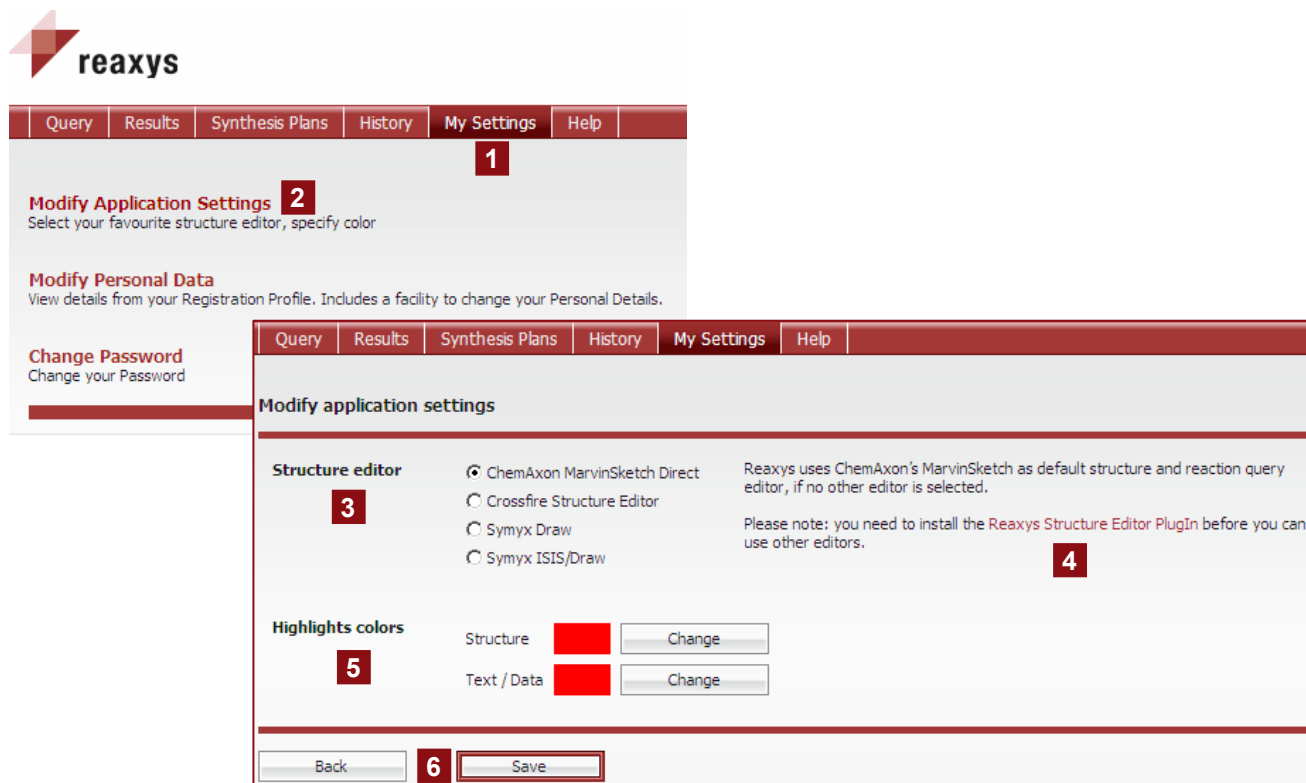
Очистить окно запроса – Clear
Загрузить запрос – Load
Сохранить запрос – Save

Как найти получение вещества?

1. Выберите из закладок (3) опцию *Reactions* и дважды щелкните в окне (5)
2. Нарисуйте структуру нужного вещества в предпочитаемом редакторе. Закрыв редактор, Вы вернетесь в Reaxys (окно 5)
3. Щелкните клавишу *Search* (6) для запуска поиска и просмотра результатов

Примечание: исходные установки Reaxys таковы, что программа начинается с поиска способов получения вещества.

Персональные настройки

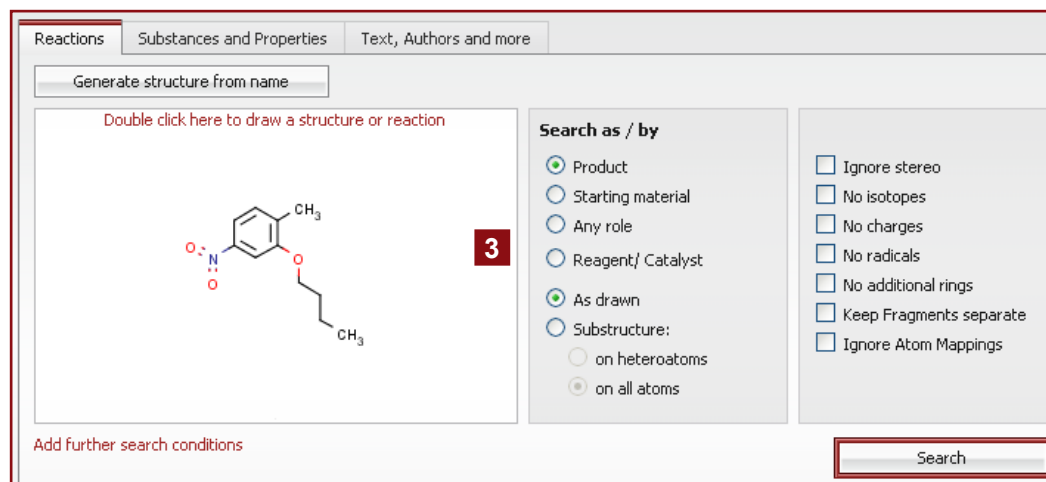
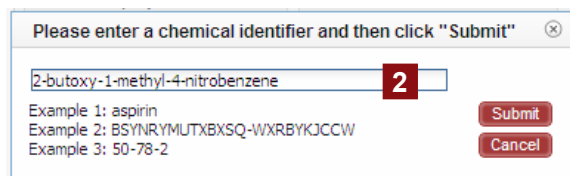
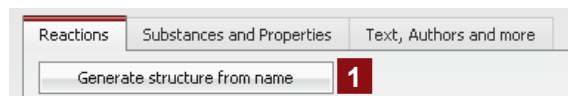


The screenshot shows the 'My Settings' page in the Reaxys application. The page has a navigation bar with tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings (active), and Help. The main content area is titled 'Modify application settings' and contains two sections: 'Structure editor' and 'Highlights colors'. The 'Structure editor' section has four radio button options: ChemAxon MarvinSketch Direct (selected), Crossfire Structure Editor, Symyx Draw, and Symyx ISIS/Draw. To the right of these options is a text box explaining that Reaxys uses ChemAxon's MarvinSketch as the default editor. The 'Highlights colors' section has two color selection fields: 'Structure' and 'Text / Data', each with a 'Change' button. At the bottom of the page are 'Back' and 'Save' buttons. Numbered callouts are placed as follows: 1 points to the 'My Settings' tab; 2 points to the 'Modify Application Settings' header; 3 points to the 'Structure editor' section; 4 points to the explanatory text for the structure editor; 5 points to the 'Highlights colors' section; and 6 points to the 'Save' button.

Примечание: щелкните клавишу Save и на экране появится подтверждение, что установки обновлены. Новые установки будут действовать при последующем входе в систему.

- 1 Персональные настройки**
Используйте опцию *My settings* для:
- изменения настроек
- изменения персональных данных
- изменения пароля
- 2 Изменение настроек**
Используйте опцию *Modify application settings* для задания предпочитаемого структурного редактора, цвета структуры и текстовых данных
- 3 Структурный редактор**
Выбор предпочитаемого редактора
- 4 Информация**
об используемом по умолчанию структурном редакторе;
о плагине, требуемом для инсталляции других редакторов
- 5 Выбор цвета**
для искоемых структур и / или текста / данных
- 6 Возврат и сохранение**
Подтверждение новых настроек – *Save*.
Для возврата к списку настроек – *Back*

Генерация структуры из названия



Опция доступна для запросов по реакциям и веществам / свойствам

1

Генерация структуры из названия

Щелкните эту клавишу, чтобы открыть поле ввода

2

Поле ввода

Ввод систематического или тривиального химического названия, регистрационного номера CAS, или ключа InChI. Для генерации структуры - клавиша **Submit**

3

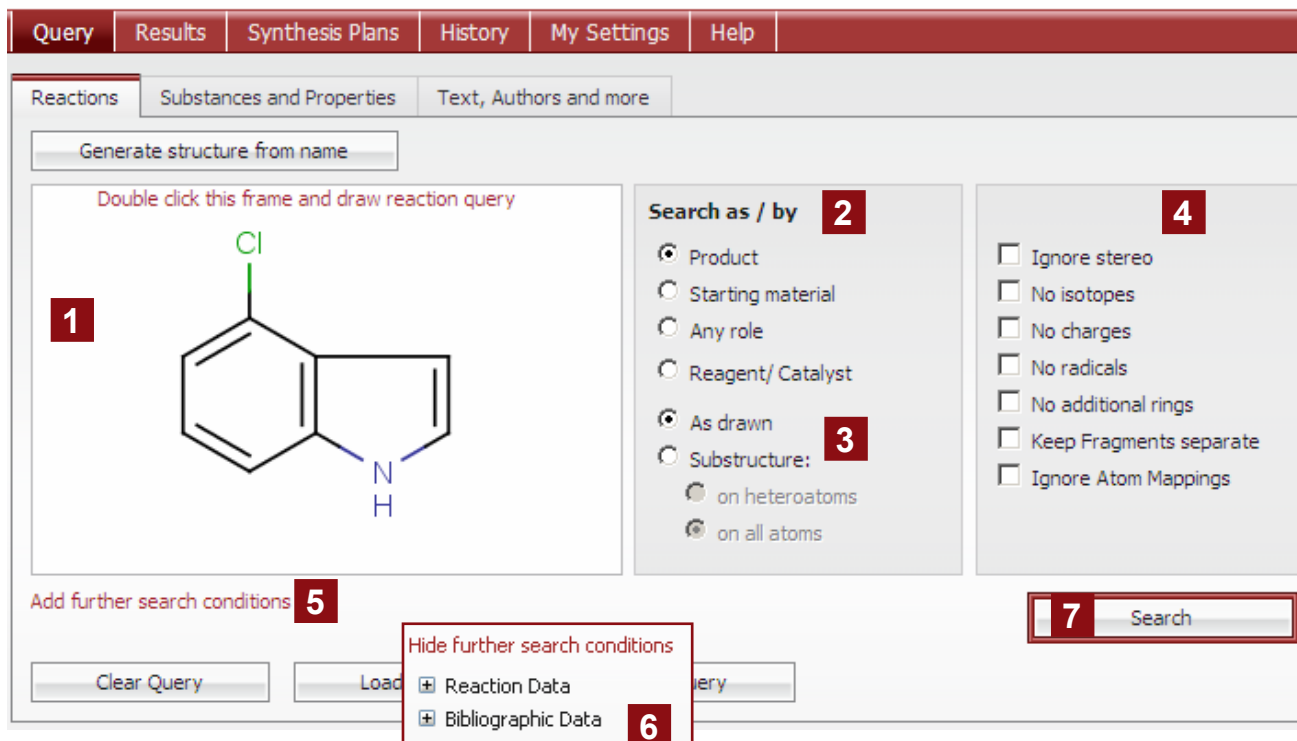
Окно ввода Структуры / Реакции

После появления сгенерированной структуры в окне можно:

- Начать поиск.
- Отредактировать структуру (двойной щелчок в окне или посредством правой клавиши); изменить ее в структурном редакторе.
- Определить тип поиска, добавить дополнительные поисковые условия и / или выбрать дополнительные опции

Примечание: эта опция работает только при наличии соответствующих веществ в базе данных Reaxys.

Запрос по реакциям Закладка Reactions



The screenshot shows the Reaxys Reactions search interface. It includes a top navigation bar with tabs: Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings, and Help. Below this is a sub-navigation bar with tabs: Reactions, Substances and Properties, and Text, Authors and more. The main search area contains a 'Generate structure from name' input field, a chemical structure editor (labeled 1) with a chlorine atom and a nitrogen atom, a 'Search as / by' section (labeled 2) with radio buttons for Product, Starting material, Any role, Reagent/ Catalyst, As drawn (selected, labeled 3), and Substructure: (with options for on heteroatoms and on all atoms), a 'Search' button (labeled 7), and a 'Clear Query' button. There are also checkboxes for 'Ignore stereo', 'No isotopes', 'No charges', 'No radicals', 'No additional rings', 'Keep Fragments separate', and 'Ignore Atom Mappings' (labeled 4). At the bottom, there are buttons for 'Add further search conditions' (labeled 5) and 'Hide further search conditions', and a 'Load' button. A dropdown menu for 'Bibliographic Data' (labeled 6) is also visible.

1 Окно ввода Структуры / реакции

Содержит искомую структуру или реакцию и дополнительные опции

2 Поиск по ролям As / by

Задание роли искомого вещества: продукт, исходное вещество, любая роль, реагент / катализатор

3 Выбор типа поиска

As drawn – как нарисовано в окне (включая дополнительные опции); *Substructure* – как структурный фрагмент (в этом случае результаты будут включать дополнительные заместители)

4 Дополнительные опции

Используются для уточнения поиска

5 Добавление дополнительных условий поиска

Ввод ограничений (на реакционные или библиографические данные)

6 Данные о реакции / библиографические данные

Уточнение поиска – добавление данных о реакции (например, выход) и / или авторе

7 Поиск

Запуск поиска – Search. Появление окна Search Progression позволит прервать поиск (Cancel) или перейти к просмотру результатов (View)

Как загрузить сохраненный запрос?

1. На закладке Query выбрать опцию Load Query
2. Использовать клавишу Browse для выбора сохраненного XML-файла, затем клавишу Open

File | C:\Documents and Settings\rypensc\Desktop\Reaxys\Cycle.xml | Browse... | Open

Запрос по реакциям Дополнительные условия поиска

1 Reaction Data

Reactant name is

Product name is

Reagent is

Yield is

All Reaction fields

2 is

3 acet anhydride

4 between 70-90

5 Bibliographic Data

Author is

Patent Assignee is

Journal Title is

Title is

Patent Number is

Patent Country Code is

Publication Year is

Title/ Abstract/ Keywords is

6 journal of organic chemistry

3 journal of organic chemistry ussr (english translation)

1 Данные о реакции

Задание реактанта, продукта, реагента, выхода и / или все поля реакции.

Разные поля объединяются булевым оператором AND

2 Операторы

Выберите соответствующие операторы в выпадающем меню

3 Список терминов для выбора

Появляется при начале печати

4 Числовые поля

Для числовых полей – выбрать оператор и ввести число или интервал в текстовое окно

5 Библиографические данные

Ввод автора, патентовладельца, названия журнала, заглавия, номера патента, кода страны патентования, года публикации, и / или названия / реферата / ключевых слов

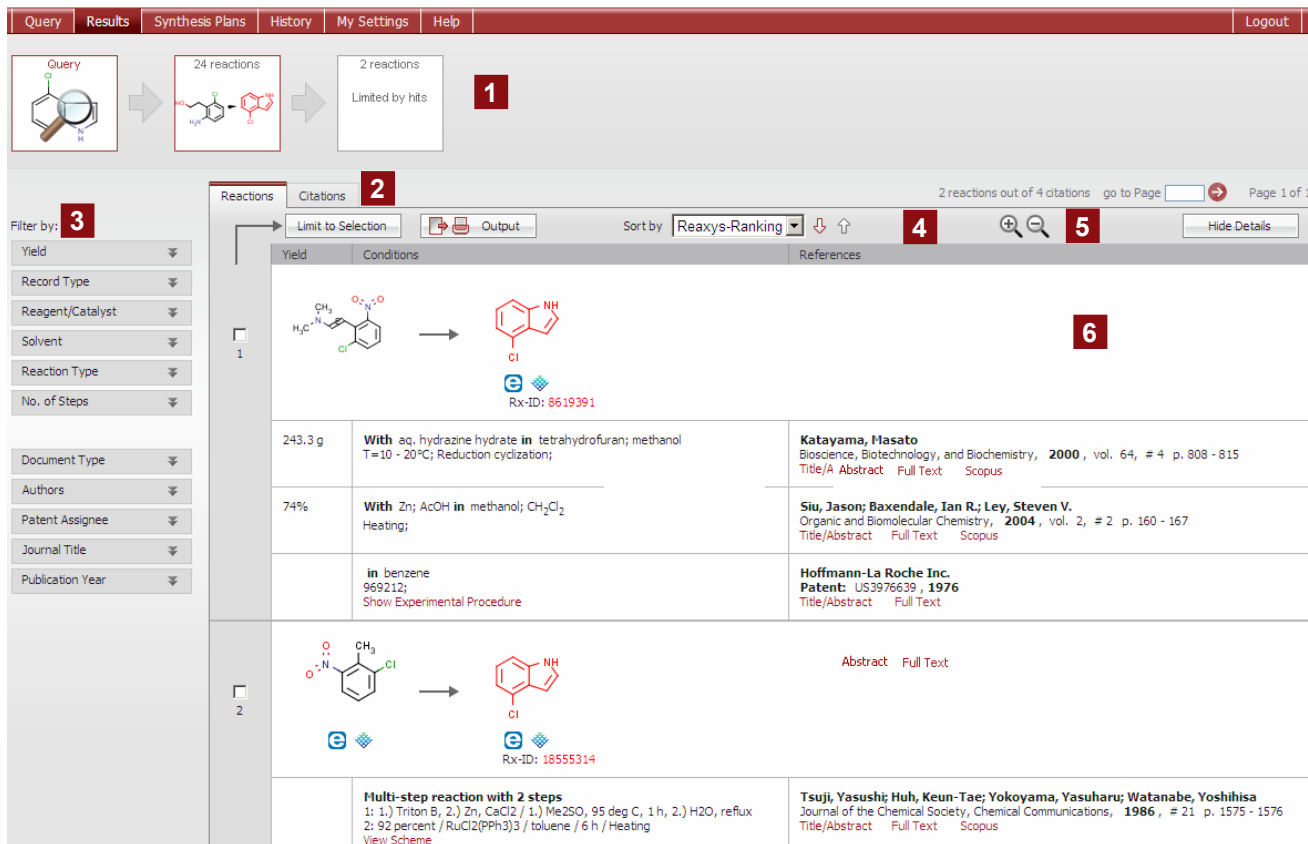
Разные поля объединяются булевым оператором AND.

6 Название / реферат / ключевые слова

При введении нескольких терминов в это текстовое окно разделяйте их знаком “;” – они будут объединены булевым оператором OR

Примечание: сходные результаты можно достичь, применяя фильтры к наборам полученных результатов

Результаты поиска по реакциям Общий вид



Этапы поиска (1) в верхней части экрана показывают действия, выполненные с исходным набором результатов. Для быстрого перехода к предыдущему набору данных или запросу – щелкните одно из окон с красной рамкой

1 Этапы поиска

Графическая навигация помогает отслеживать результаты поиска

2 Закладки Reactions / Citations

По умолчанию выводятся реакции, но можно переключиться на ссылки

3 Фильтрация

Уточнение результатов с помощью фильтров, связанных с реакцией (выход, тип записи, реагент / катализатор, растворитель, тип реакции, число стадий) или библиографической информацией (тип документа, авторы, патентовладелец, название журнала и год публикации)

4 Инструментальная панель

Limit To Selection – ограничения;
Output – вывод результатов;
Sort – сортировка данных

5 Увеличение / Уменьшение

Для увеличения или уменьшения размера выведенных на экран структур

6 Результаты поиска по реакции

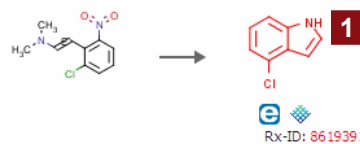
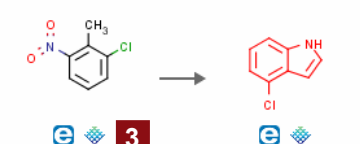
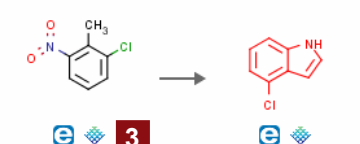
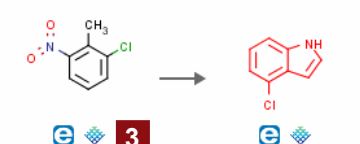
Общий обзор выведенных на экран результатов с ключевыми данными в табличном виде, с доступом к заглавию и реферату оригинальной статьи или патента (полному тексту), к родственной информации в базе данных Scopus.

Результаты поиска по реакциям Закладка Reactions

Щелкните по структуре для появления меню с информацией

Reactions Citations 2 reactions out of 4 citations go to Page Page 1 of 1

4 Limit to Selection 5 Output 6 Sort by Reaxys-Ranking

Yield	Conditions	References
<div>1</div>  <div> 1 Reaxys-RN: 114880 MF: C8H6ClN MW: 151.595 CAS-RN: 25235-85-2 Show Details Plan a Synthesis Copy Structure to Clipboard </div>	243.3 g With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; T=10 - 20°C; Reduction cyclization;	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus
<div>2</div>  <div> 3 Rx-ID: 18555314 </div>	74% With Zn; AcOH in methanol; CH ₂ Cl ₂ ; Heating;	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus
<div>2</div>  <div> 3 Rx-ID: 18555314 </div>	in benzene 969212; Show Experimental Procedure 2	Hoffmann-La Roche Inc. Patent: US3976639, 1976 Title/Abstract Full Text 2
<div>2</div>  <div> 3 Rx-ID: 18555314 </div>	Multi-step reaction with 2 steps 1: 1.) Triton B, 2.) Zn, CaCl ₂ / 1.) Me ₂ SO, 95 deg C, 1 h, 2.) H ₂ O, reflux 2: 92 percent / RuCl ₂ (PPh ₃) ₃ / toluene / 6 h / Heating View Scheme 2	Tsuji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshihisa Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, 1986 , # 21 p. 1575 - 1576 Title/Abstract Full Text Scopus

Примечание: информация о закладке Citations в окне результатов находится на стр. 19.

- Дополнительная информация**
Регистрационный номер Reaxys; Молекулярная формула; Молекулярный вес; Регистрационный номер CAS; Вывод физических свойств, спектральных и др. данных; Создание схемы ретросинтеза; Копирование структуры в буфер обмена
- Доступ к библиографическим деталям**
Название / реферат, полный текст, доступ к Scopus; Показ экспериментальных процедур из патентов; Просмотр схемы многостадийных последовательностей в виде плана синтеза
- Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества с указанием подходящего поставщика (eMolecules / ACD)
- Отбор результатов**
Ограничение набора ответов избранными результатами
- Вывод**
Экспорт данных в желаемом формате
- Сортировка**
Сортировка результатов по возрастанию ↑ или убыванию ↓ по номерам Reaxys-RxID, выходам или по умолчанию (ранжирование Reaxys).

Результаты поиска по реакциям Фильтрация

1 Filter by:

Yield ▾

Record Type ▾

Reagent/Catalyst ▾

Solvent ▾

Reaction Type ▾

2 ☐ reduction 1 **3**

☐ cyclization 1

☐ (no entry given) 1

Limit to Exclude **4**

No. of Steps ▾

5 Document Type ▾

Authors ▾

Patent Assignee ▾

☐ hoffmann-la roche 1

☐ (no entry given) 6

Limit to Exclude

Journal Title ▾

☐ tetrahedron letters 2

☐ organic and biomolecular chemistry 1

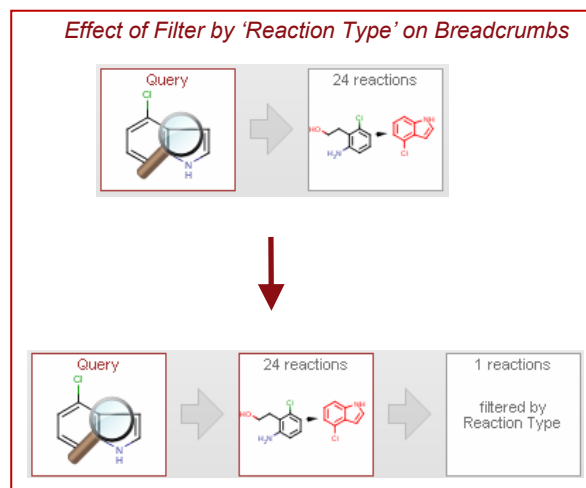
☐ journal of the american chemical society 1

☐ journal of organic chemistry 1

More **6**

Limit to Exclude

Publication Year ▾



Примечание: фильтрация (по реакциям, библиографии) обеспечивает быстрое и легкое уточнение полученных результатов.

1 Фильтрация

Выбор фильтра (ов), относящихся к характеристикам реакции:

- выход
- тип записи
- реагент / катализатор
- растворитель
- тип реакции
- число стадий

Щелкните двойные стрелки, чтобы получить список терминов.

2 Кнопки выбора терминов

Для ограничения (Limit to) или исключения (Exclude) терминов

3 Встречаемость терминов

Например, количество реакций восстановления / циклизаций – 1

4 Ограничение / Исключение термина

Limit to - ограничение результатов выбранным термином

Exclude -исключение термина из результатов

5 Фильтрация

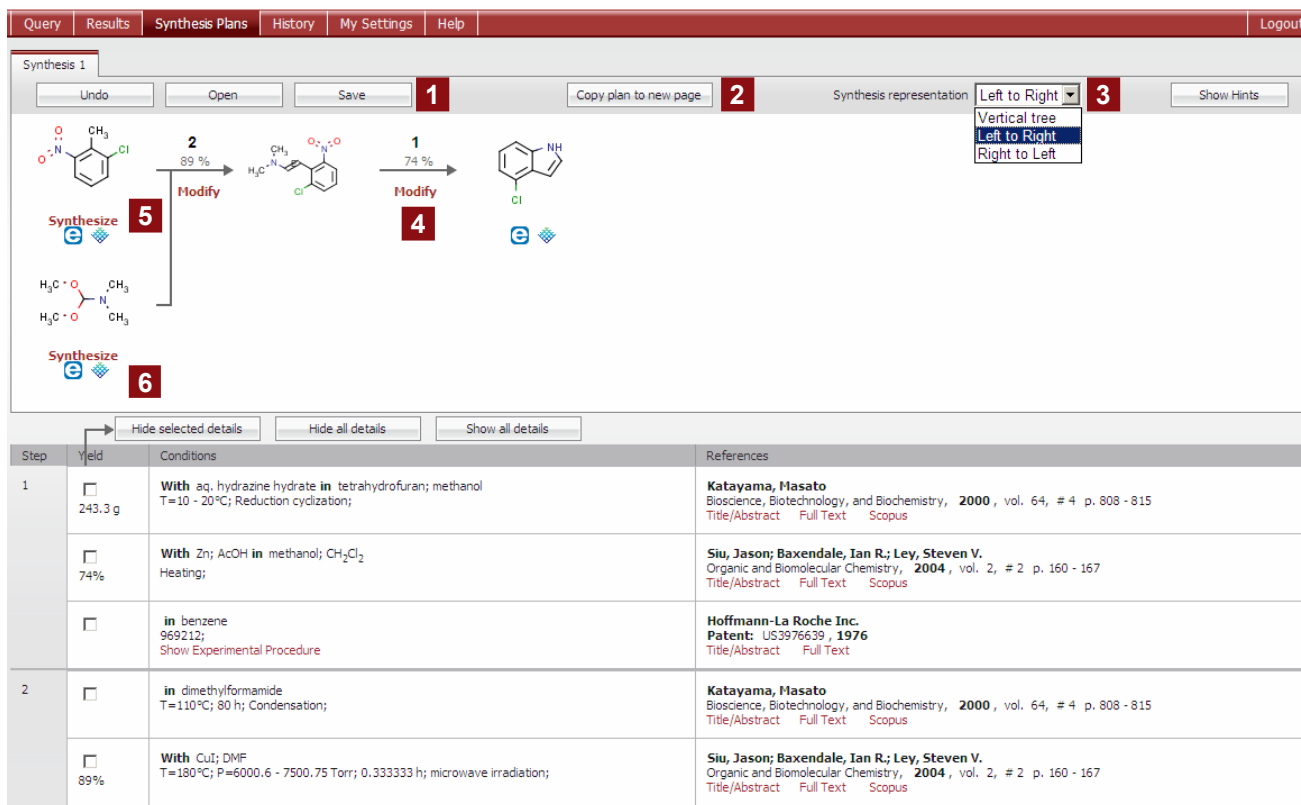
Выбор фильтра, относящегося к библиографическим данным:

- тип документа
- авторы
- патентовладелец
- название журнала
- год публикации

6 Дополнительные опции

Вывод дополнительных опций

Планирование синтеза



Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/> 243.3 g	With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; methanol T=10 - 20°C; Reduction cyclization;	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/> 74%	With Zn; AcOH in methanol; CH ₂ Cl ₂ Heating;	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/>	in benzene 969212; Show Experimental Procedure	Hoffmann-La Roche Inc. Patent: US3976639, 1976 Title/Abstract Full Text
2	<input type="checkbox"/>	in dimethylformamide T=110°C; 80 h; Condensation;	Katayama, Masato Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000 , vol. 64, # 4 p. 808 - 815 Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/> 89%	With CuI; DMF T=180°C; P=6000.6 - 7500.75 Torr; 0.333333 h; microwave irradiation;	Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V. Organic and Biomolecular Chemistry, 2004 , vol. 2, # 2 p. 160 - 167 Title/Abstract Full Text Scopus

Примечание: на странице планирования синтезов Synthesis Plans можно вывести полные схемы многостадийных реакций. Для более удобного просмотра щелчок по View scheme открывает многостадийную последовательность как новый План синтеза.

Щелкните по структуре в любой закладке результатов. При выборе опции "Plan a synthesis" произойдет переход на страницу планирования синтеза.

- Отмена, Открытие, Сохранение**
Undo – отмена последнего действия
Open – открытие плана синтеза
Save – сохранение плана синтеза
- Копирование Плана на новую страницу**
Открывается новая закладка текущего плана синтеза, где можно разработать другой ретросинтез.
- Представление Планов синтеза**
Выбор горизонтальной или вертикальной развертки вывода
- Изменение**
Опция Modify отменяет уже определенную синтетическую стадию и предлагает другие способы получения вещества
- Синтез**
Опция Synthesize выводит различные методы получения вещества. Клавиша Add включает выбранную стадию в ретросинтез
- Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества и поставщиках (eMolecules / ACD)

Вывод данных

Output Reaction Results

Output 1 ☒ Reactions Table ☐ Reactions Citation Table

to 2 ☒ PDF/Print ☐ XML ☐ Literature Management Systems (e.g. ReferenceManager, EndNote etc.) ☐ RD File

☐ Microsoft Word ☐ Microsoft Excel

☐ Include the following headline 3

Output range 4 ☒ All Hits ☐ Selected hits ☐ Range: e.g. 1, 2-5, 10

Output contains 5 ☒ include Structures ☒ include Experimental Procedure ☒ All available data ☐ Identification data only

Output ☐ Reactions Table ☒ Reactions Citation Table

Output contains ☒ include Structures ☒ include Abstracts 5

Output ☐ Substance Grid ☒ Substance Details Table ☐ Substance Citations Table

Output contains ☒ include Structures ☒ All available data ☐ Identification data only ☐ Select data 5

OK **Cancel** 6

Spectra ☒ NMR Spectroscopy (30) ☒ IR Spectroscopy (29) ☒ Mass Spectrometry (22)

Physical Data ☒ Melting Point (26) ☒ Crystal Property Description (21) ☒ Further Information (15)

Bioactivity/Ecotox ☒ Ecotoxicology (23) ☒ Pharmacological Data (12) ☒ Concentration in the Environment (2)

Use/Application ☒ Use (21)

Natural Product ☒ Isolation from Natural Product (3) ☒ Derivative (2) ☒ Purification (1)

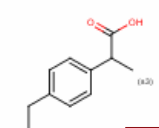
Примечание: функция вывода данных имеется на каждом экране Результатов; она обеспечивает экспорт результатов любого типа (Реакции, Вещества и Библиографические данные) в любом желаемом формате. В таблице Substance Details опция **Select data** позволяет выбрать тип свойств, которое желаете экспортировать.

- Вывод данных**
Выбор типа вывода результатов:
- В формат**
Определение формата экспортируемого файла: PDF/Print, XML, Microsoft Word, Microsoft Excel, TXT (Literature Management Systems), RD.
- Введение заголовка**
Отметьте окно и введите заголовок, который появится на каждой странице документа
- Диапазон вывода данных**
Определите данные для вывода: все результаты – All Hits; избранные результаты – Selected Hits (отберите их прежде, чем щелкните клавишу Вывод); диапазон результатов (в окне Range)
- Содержание вывода данных**
Определите тип данных для вывода:
Вывод реакций: включает структуры и / или экспериментальные процедуры, все имеющиеся данные или только данные по идентификации.
Вывод веществ: включает структуры и все имеющиеся данные, или только данные по идентификации, или избранные данные.
Вывод ссылок: включает структуры и / или рефераты
- Клавиша OK**
OK – начать экспорт результатов;
Cancel – остановить экспорт.

История

Query Results Synthesis Plans **History** My Settings Help Logout

Combine hitsets **5** Select at least two hitsets for combining

	Query	Temporary result description	Date
4	<input type="checkbox"/> 1 Edit Text/Authors: (Authors: 'snyder, p th ') AND (Publication Year: All years)	26 citations	View Store Today
	<input type="checkbox"/> 2 Edit Text/Authors: (Authors: 'nasielski') AND (Publication Year: All years)	24 citations	View Store Today
	2		
<input type="checkbox"/> 3	Edit Text/Authors: (Authors: 'nasielski') AND (Publication Year: All years)	PhD Work 24 citations ULB	View Remove 2009-01-23
<input type="checkbox"/> 4	 Edit Substances: As drawn	Project 5HT2b 620 substances To test	View Remove 2009-01-23
<input type="checkbox"/> 5			

3

Combine hitsets **5** →

Select how you want to combine the hitsets

If 2 hits selected

Merge 3 with 4 Overlap 3 with 4 Exclude 3 from 4 Exclude 4 from 3

If >2 hits selected

Merge all Overlap all

Примечание: таблица History показывает все итоги текущего сеанса поиска, полученные в результате запросов или анализа результатов; самые свежие наборы результатов находятся сверху списка. Здесь также возможно графическое объединение наборов.

1 Временные списки

Верхняя часть таблицы показывает все наборы результатов текущего сеанса. Опция **View** – вывод списка как активного набора на странице Результаты. Опция **Store** (введите имя файла и комментарий) – для сохранения списка

2 Сохраненные списки

Нижняя часть таблицы показывает наборы результатов, сохраненные пользователем. Все сохраненные наборы результатов выводятся, если пользователь входит в Reaxys. Опция **Remove** – для удаления сохраненного списка

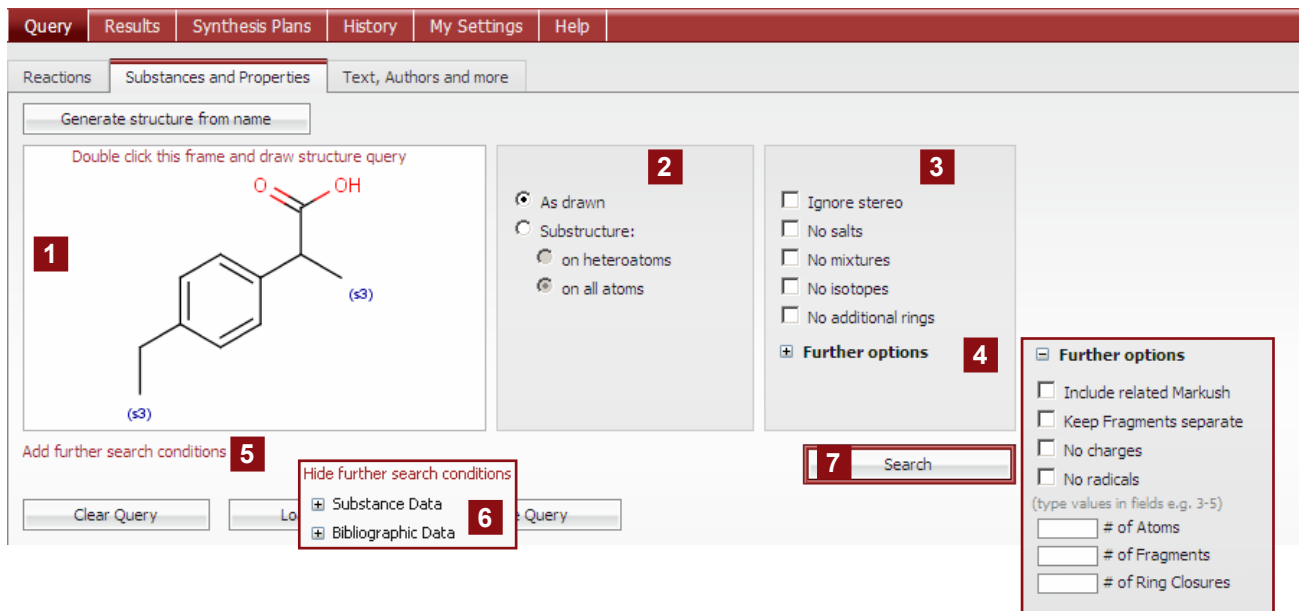
3 Колонка запросов

Опция **Edit** – вывод на экран исходного запроса, связанного с набором результатов со страницы Query. Учтите, что для набора результатов, полученного с использованием Фильтрации, исходный запрос в этой колонке не выводится

4 Объединение наборов результатов

5 Выберите два или более списка, отметив их номера в колонке Запрос; при этом активируется клавиша Combine hitsets, обеспечивающая графический инструментальный для объединения выбранных наборов разными способами.

Запрос по веществам и свойствам Закладка Substances and Properties



Как найти информацию о конкретных веществах?

1. Выберите закладку *Substances and Properties* и дважды щелкните в окне (1)
2. Нарисуйте структуру нужного вещества в предпочитаемом редакторе. Закрыв редактор, Вы вернетесь в Reaxys (окно 1)
3. Щелкните клавишу Search (7) для запуска поиска и просмотра результатов

Примечание: Reaxys запоминает последнюю использованную форму запроса и открывает ее при следующем поиске; в таком случае закладка *Substances and Properties* может стать входной формой запроса по веществам и свойствам.

1 Окно структура / реакция

Содержит искомую структуру и дополнительные опции

2 Искать как

Определите тип структурного поиска:
As drawn – поиск на полное соответствие
Substructure – как фрагмент структуры

3 Дополнительные опции запроса

Выбор дополнительных опций, уточняющих запрос

4 Дальнейшие опции

При необходимости используйте дальнейшие опции: включить родственную структуру Маркуша, задать отсутствие зарядов, т.д.

5 Дополнительные условия поиска

Ввод дополнительных ограничений на данные о веществе или библиографические данные. При этом появится меню 6

6 Данные о веществе / библиографические данные

Уточнение запроса, например, конкретным физическим свойством и / или автором

7 Поиск

Search – начало поиска

Запрос по веществам Дополнительные условия поиска

1 Substance Data

Search text in all facts

Search for **2**

☐ Identification Data
☐ Physical Data
☐ Spectroscopic Data
☐ Bioactivity Data
☐ Ecotoxicological Data

2
 starts with
 ends with
 contains

Substance Data

Search text in all facts

Search for

☐ Identification Data
☐ Physical Data

☐ Physical Data available
☐ Melting Point available or **2**
☐ Boiling Point available or **2**
☐ Density available or **2**
☐ Solubility Data available or **2**
☐ pK value available or **2**
☐ Refractive Index available
☐ Optical Rotation data available
☐ POW available

3 Bibliographic Data

Author

Patent Assignee

Journal Title **2** journal of org **4**

Title journal of organic chemistry

Patent Number journal of organic chemistry ussr (english translation)

Patent Country Code journal of organometallic chemistry

Publication Year journal of organometallic chemistry library

Title/ Abstract/ Keywords **5** journal of pharmacokinetics and biopharmaceutics

journal of pharmacokinetics and pharmacodynamics

journal of pharmacology and experimental therapeutics

Примечание: подобные результаты можно получить, применяя фильтры к наборам поисковых ответов.

1 Данные по веществам
Задайте поиск: текстовый по всем фактам (свойствам) (при добавлении в это окно нескольких терминов разделяйте их знаком “;” – они будут связаны булевым оператором OR); по данным для идентификации веществ; по физическим и спектроскопическим данным; по биоактивности и / или экотоксикологическим данным. Разные поля объединяются булевым оператором AND

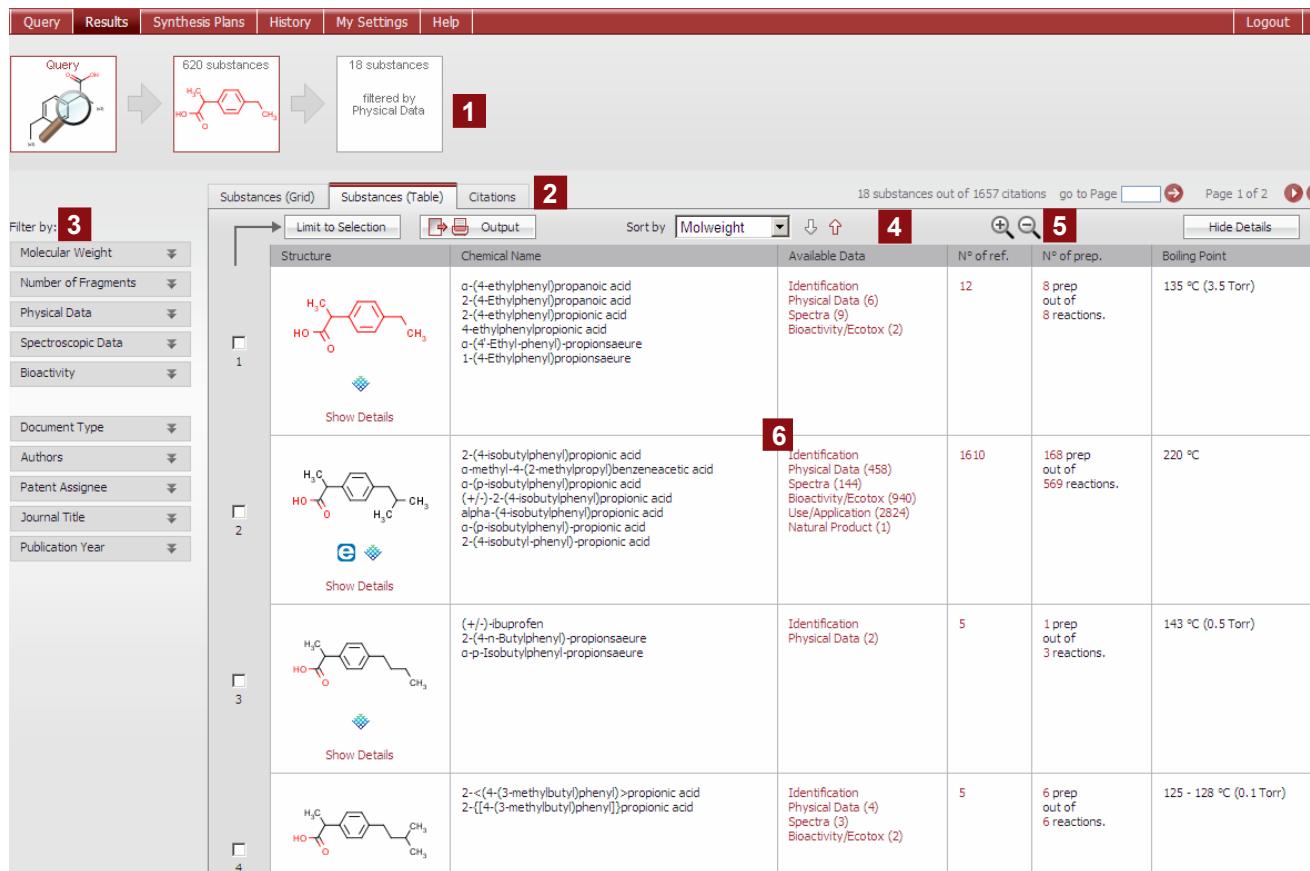
2 Операторы
Выберите подходящие операторы в выпадающем меню; для числового поля введите в текстовое окно число или интервал чисел

3 Библиографические данные
Задайте авторов, патентовладельца, название журнала, заглавие, номер патента, код страны патентования, год публикации и / или название / реферат / ключевые слова. Разные поля объединяются булевым оператором AND

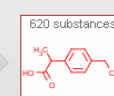
4 Список терминов для выбора
Появляется при начале печати

5 Название / Реферат / Ключевые слова
При добавлении нескольких терминов в это текстовое окно разделяйте их знаком “;” – они будут связаны булевым оператором OR

Вещества и свойства Просмотр результатов



Query Results Synthesis Plans History My Settings Help Logout

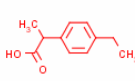
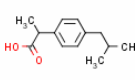
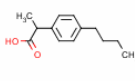
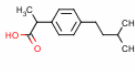
Query:  620 substances → 18 substances filtered by Physical Data **1**

Substances (Grid) Substances (Table) Citations **2** 18 substances out of 1657 citations go to Page Page 1 of 2

Filter by: **3**

- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Physical Data
- Spectroscopic Data
- Bioactivity
- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Limit to Selection **4** Output Sort by Molweight **5** Hide Details

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.	Boiling Point
 1	o-(4-ethylphenyl)propanoic acid 2-(4-ethylphenyl)propanoic acid 2-(4-ethylphenyl)propionic acid 4-ethylphenylpropionic acid o-(4-ethylphenyl)-propionsaeure 1-(4-ethylphenyl)propionsaeure	Identification Physical Data (6) Spectra (9) Bioactivity/ECotox (2)	12	8 prep out of 8 reactions.	135 °C (3.5 Torr)
 2	2-(4-isobutylphenyl)propionic acid o-methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetic acid o-(p-isobutylphenyl)propionic acid (+/-)-2-(4-isobutylphenyl)propionic acid alpha-(4-isobutylphenyl)propionic acid o-(p-isobutylphenyl)-propionic acid 2-(4-isobutyl-phenyl)-propionic acid	Identification Physical Data (458) Spectra (144) Bioactivity/ECotox (940) Use/Application (2824) Natural Product (1)	1610	168 prep out of 569 reactions.	220 °C
 3	(+/-)-ibuprofen 2-(4-n-Butylphenyl)-propionsaeure o-p-Isobutylphenyl-propionsaeure	Identification Physical Data (2)	5	1 prep out of 3 reactions.	143 °C (0.5 Torr)
 4	2-((4-(3-methylbutyl)phenyl)>propionic acid 2-[[4-(3-methylbutyl)phenyl]]propionic acid	Identification Physical Data (4) Spectra (3) Bioactivity/ECotox (2)	5	6 prep out of 6 reactions.	125 - 128 °C (0.1 Torr)

Примечание: информация о закладке *Citation* в окне результатов по веществам находится на стр. 19.

1 Этапы поиска

Графическая навигация помогает при анализе результатов поиска

2 Закладки Вещества (сетка) / Вещества (таблица) / Ссылки

Вывод результатов в табличном виде - по умолчанию; можно переключиться на вывод в виде сетки или на вывод Ссылок

3 Фильтрация

Уточнение результатов с помощью фильтров, связанных с веществом (молекулярный вес, число фрагментов, физические или спектроскопические данные, биоактивность) или с библиографией (тип документа, авторы, патентовладелец, название журнала и год публикации)

4 Инструментальная панель

Limit To Selection – ограничение выбора; Output – вывод результатов; Sort – сортировка данных

5 Увеличение / Уменьшение

Увеличение или уменьшение размера выведенных на экран структур

6 Результаты по веществам и свойствам

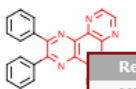
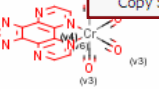
Обзор результатов с выводом ключевых данных в табличном виде. Гиперссылки на детали и данные позволяют вывести свойства для каждого найденного вещества

Результаты поиска по веществам и свойствам

Вывод в виде таблицы

Substances (Grid) Substances (Table) Citations 533 substances out of 116 citations go to Page Page 1 of 36

Limit to Selection Output Sort by Molweight 6 Hide Details

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.	Boiling Point
	2,3-Diphenyl-1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene	Identification Spectra (4)	2	4 prep out of 7 reactions.	
	[1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene]chromium(0)	Physical Data (2) Spectra (3)	2	1 prep out of 1 reactions.	

1 Reaxys-RN: 3630324
MF: C₂₄H₁₄N₆
MW: 386.415
CAS-RN: 129012-12-0
Show Details
Plan a Synthesis
Copy Structure to Clipboard

2 Hide Details

3 Structure/Compound Data

Reaxys Registry Number: 17417054
CAS Registry Number:
Chemical Name: tetracarbonyl[1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene]chromium(0)
Type of Substance:

Molecular Formula: C₁₆H₆CrN₆O₄
Linear Structure Formula: (C₁₂H₆N₆)Cr(CO)₄
Molecular Weight: 398.257
InChi Key:

4 Physical Data

5 Molecular Deformation (1)
Crystal Property Description (1)

Colour & Other Properties	Comment	Reference
blue violet	from Gmelin	Nasielski-Hinkens, R.; Benedek-Vamos, M.; Maetens, D.; Nasielski, J. J. Organomet. Chem., 1981, vol. 217, p. 179 - 182 Full Text

6 Spectra

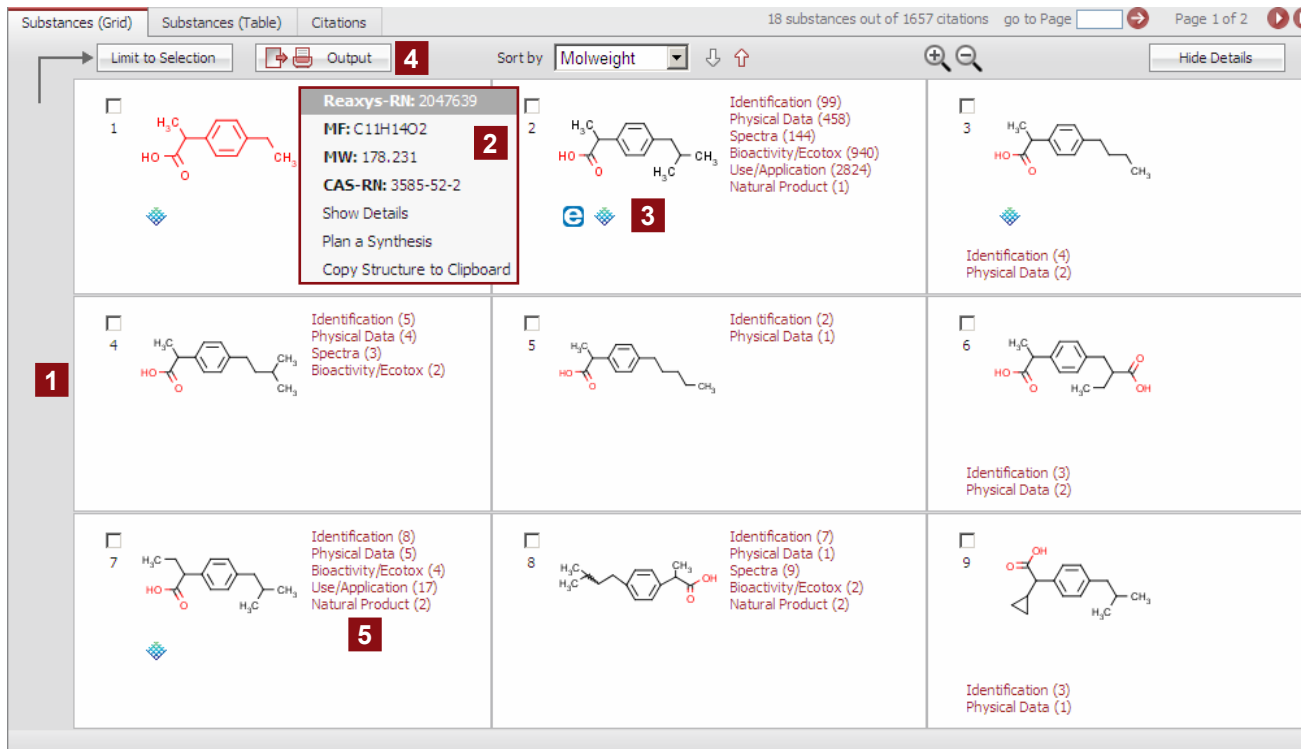
Щелкните по структуре для появления меню с дополнительной информацией

- Дополнительная информация**
Регистрационный номер Reaxys;
Молекулярная формула;
Молекулярный вес;
Регистрационный номер CAS; Вывод данных о структуре / веществе;
Создание схемы ретросинтеза;
Копирование структуры в буфер обмена
- Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества и компаниях-поставщиках (eMolecules / ACD).
- Кнопка показать / спрятать детали**
- Данные структура / соединение**
Поиск деталей о структуре / соединении
- Доступные данные**
Доступ к данным из источников по органической, неорганической и элементоорганической химии. Сведения из базы данных Gmelin имеют флажок from Gmelin
- Сортировка**
Сортировка результатов по возрастанью ↑ или убыванию ↓ регистрационного номера Reaxys и молекулярного веса (по умолчанию)

Show Details - вывод списка всех типов данных, доступных для вещества.
В колонке Available Data - вывод нужных данных о веществе.

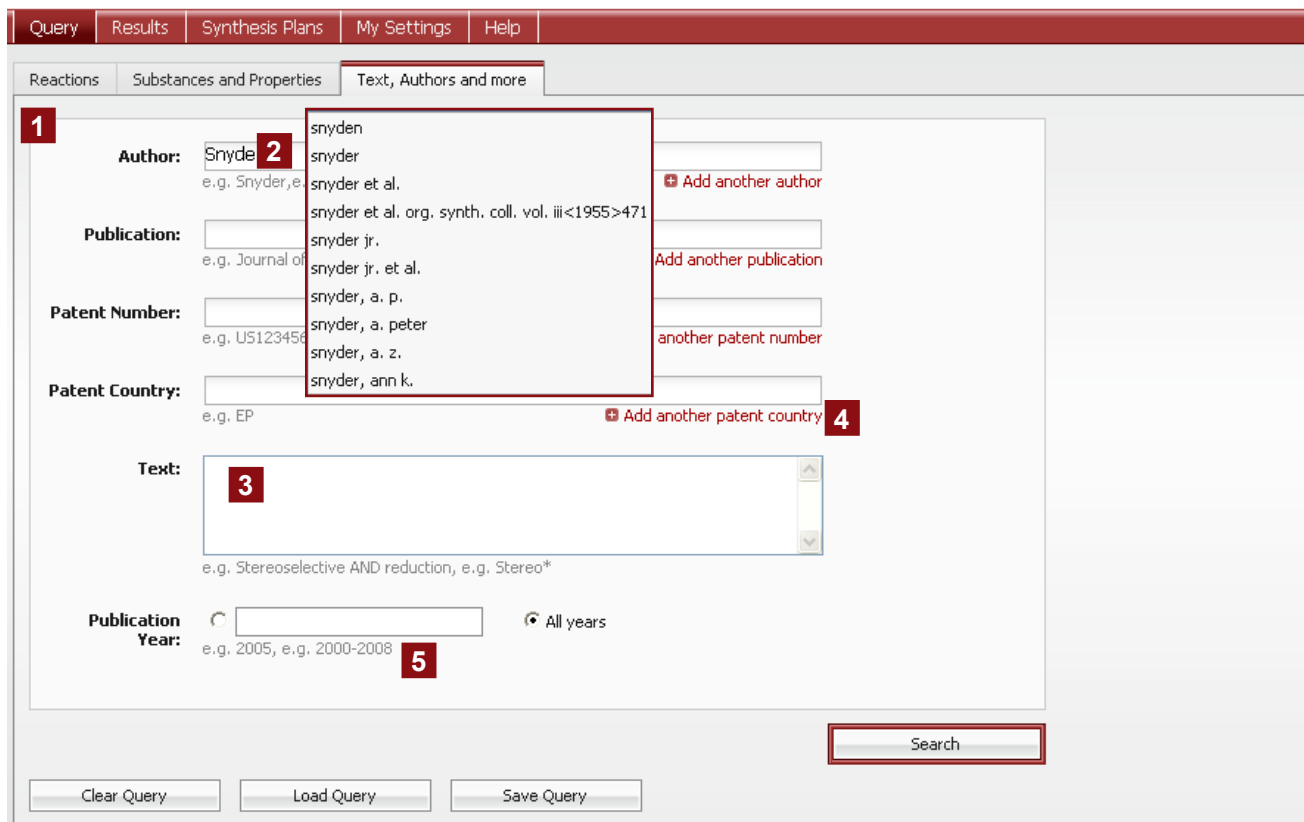
Результаты поиска по веществам и свойствам

Вывод в виде сетки



- 1 **Вывод результатов в виде сетки**
Быстрый просмотр результатов - в виде сетки
- 2 **Дополнительная информация**
Щелкните по структуре для появления меню с дополнительной информацией:
Регистрационный номер Reaxys;
Молекулярная формула;
Молекулярный вес;
Регистрационный номер CAS;
Вывод данных о структуре / веществе; Создание схемы ретросинтеза; Копирование структуры в буфер обмена
- 3 **Коммерческая доступность**
Информация о коммерческой доступности вещества и компаниях-поставщиках (eMolecules / ACD).
- 4 **Вывод результатов**
Экспорт результатов в желаемом формате
- 5 **Доступные данные для этого вещества**

Поиск библиографической информации Закладка Text, authors and more



1

2

3

4

5

1 Страница поиска

Ввод автора, публикации (например, названия журнала), номера патента, страны патентования, текстовой информации и / или года публикации

Разные поля будут связаны булевым оператором AND

2 Список терминов для выбора

Появляется при начале печати.

3 Текст

Введите текстовые термины и свяжите их с помощью булевых операторов по своему выбору. При необходимости используйте усечения:

"*" = любое число знаков

"?" = один знак

4 Добавить другой термин

Ввод текстовых полей для дополнительных поисковых терминов (например, страна патентования)

Если в одном поле выбраны несколько терминов, они будут связаны булевым оператором OR

5 Примеры

Год публикации

Примечание: в окне Text (3) можно использовать и вводить следующие булевы операторы: AND, OR, PROXIMITY, NEAR и NEXT.

Результаты поиска библиографической информации Закладка Citations

26 citations go to Page Page 1 of 3

Filter by: **1**

- Document Type
- Authors
- Patent Assignee
- Journal Title
- Publication Year

Limit to Selection **2** Output

Sort by Publication Year **3**

	Title of the Document	Authors	Year	Source	Times cited
<input type="checkbox"/> 1	Biocatalytic Microcontact Printing	Snyder, Phillip W.; Johannes, Matthew S.; Vogen, Briana N.; Clark, Robert L.; Toone, Eric J.	2007	Journal of Organic Chemistry, 2007, vol. 72, # 19 p. 7459 - 7461 Full Text Scopus	
	4 Title/Abstract Show All Reactions (13) Show All Substances (11)				
<input type="checkbox"/> 2	Nucleic acid molecules, polypeptides and uses therefor, including diagnosis and treatment of Alzheimer's disease	Durham, L. Kathryn; Friedman, David L.; Herath, Herath Mudiyansele Athula Chandrasiri; Kimmel, Lida H.; Parekh, Rajesh Bhikhu; Potter, David M.; Rohlf, Christian; Silber, B. Michael; Snyder, Peter Jeffrey; Soares, Holly Daria; Stiger, Thomas R.; Sunderland, P. Trey; Townsend, Robert Reid; White, W. Frost; Williams, Stephen A.	2005	Patent: US2005/163789; A9 Full Text	
	Title/Abstract				
<input type="checkbox"/> 3	Nucleic acid molecules, polypeptides and uses therefor, including diagnosis and treatment of Alzheimer's disease	Durham, L. Kathryn; Friedman, David L.; Herath, Herath Mudiyansele Athula Chandrasiri; Kimmel, Lida H.; Parekh, Rajesh Bhikhu; Potter, David M.; Rohlf, Christian; Silber, B. Michael; Snyder, Peter Jeffrey; Soares, Holly Daria; Stiger, Thomas R.; Sunderland, P. Trey; Townsend, Robert Reid; White, W. Frost; Williams, Stephen A.	2004	Patent: US2004/22794; A1 Full Text	
	Title/Abstract				
<input type="checkbox"/> 4	Ethylene. Experimental Evidence for New Assignments of Electronic Transitions in the n - >n* Energy Region. Absorption and Magnetic Circular Dichroism Measurements with Synchrotron Radiation	Snyder, Patricia Ann; Atanasova, Sylvia; Hansen, Roger W. C.	2004	Journal of Physical Chemistry A: Molecules, Spectroscopy, Kinetics, Environment, & General Theory, 2004, vol. 108, # 19 p. 4194 - 4201 Full Text Scopus 5	
	Title/Abstract				

- Фильтрация**
Уточнение поисковых результатов с помощью фильтров (тип документа, авторы, патентовладелец, название журнала и год публикации)
- Вывод результатов**
Экспорт результатов в подходящем формате
- Сортировка**
Сортировка результатов в восходящем ↑ или нисходящем ↓ порядке по году публикации (по умолчанию) или авторам
- Реферат / Реакции / Вещества**
Вывод на экран реферата и показ всех реакций или всех веществ, относящихся к статье
- Источник**
Ссылка на публикацию. Можно вывести оригинальный текст посредством ссылки Full Text и получить доступ к родственной информации в базе данных Scopus

Закладки *Reactions – Substances & Properties – Citations* имеют почти те же структуру и содержание, что и закладка *Bibliographic citations*. Различие лишь в присутствии одной дополнительной ссылки на каждой из этих закладок, а также дополнительных фильтров:

- в закладках *Reactions / Citations* – на реакции из статьи: *Hit Reactions in this article (# out of total #)*
- в закладках *Substances & Properties / Citations* – на вещества из статьи: *Hit Substances in this article (# out of total #)*